



Evento	Salão UFRGS 2024: SIC - XXXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2024
Local	Virtual
Título	Aprimoramento do banco de dados de perfis-sigma do software JCOSMO para screening de líquidos iônicos
Autor	FABIANA LUFT BAVARESCO
Orientador	RAFAEL DE PELEGRINI SOARES

Consistindo somente de cátions e ânions, os líquidos iônicos (LIs) podem cumprir finalidades altamente específicas, com base no par cátion-ânion escolhido. Por isso, existem inúmeras configurações e aplicações para LIs, o que dificulta a verificação experimental do comportamento dos LIs em mistura com os diversos solventes convencionais. Portanto, o estudo de potenciais aplicações para LIs se beneficia imensamente de modelos preditivos adequados, permitindo uma exploração sistemática e eficiente das suas possibilidades industriais. Dessa forma, os objetivos desta pesquisa são: aprimorar o banco de dados LVPP-sigma para LIs com intuito de facilitar a busca por íons no software JCOSMO e sua aplicação em geral; expandir a base de dados adicionando mais íons; desenvolver uma metodologia de *screening* para analisar potenciais aplicações dos LIs. A metodologia consistiu de: pesquisa bibliográfica e busca nas plataformas digitais PubChem e IL Thermo para coleta de dados sobre espécies de LIs; investigação de inconsistências de nomenclatura e representação molecular de íons previamente adicionados ao JCOSMO; adição de íons ao banco de dados; elaboração de um script em Python para *screening* dos LIs. Como resultado, 24 íons tiveram sua estrutura molecular corrigida ou foram renomeados. Além disso, 94 íons foram adicionados ao software, gerando mais combinações possíveis de LIs para estudo. Atualmente, mais de 8800 LIs estão disponíveis no banco de dados do LVPP para predição de propriedades no pacote JCOSMO. O script desenvolvido roda paralelamente ao JCOSMO, gerando um mapa de cores interativo para analisar a interação de todas as combinações possíveis de LI com um soluto de interesse. Estas interações são determinadas com base em cálculos de coeficiente de atividade em diluição infinita (IDAC) de acordo com o modelo de tipo COSMO selecionado pelo usuário. Isso permite uma avaliação sistemática dos milhares de LIs como solventes e a sua seleção para as mais diversas aplicações.